

工學碩士 學位論文

나노유체의 열전달 특성과 기액계면의 분자거동에 관한 고찰

A Study on the Characteristics of Nanofluid on Heat Transfer
and Nano-molecular Motions at the Liquid-Vapor Interface

指導教授 鄭 在 鉉

2006年 2月

韓國海洋大學校 大學院

機 械 工 學 科

金 惠 敏

本 論文을 金惠敏의 工學碩士 學位論文으로 認准함

委 員 長 工學博士 李 英 浩 ㉠

委 員 工學博士 尹 相 國 ㉠

委 員 工學博士 鄭 在 鉉 ㉠

2006年 2月

韓國海洋大學校 大學院

機 械 工 學 科

金 惠 敏

목 차

List of tables	iii
List of figures	iii
Abstract	v
1. 서론	1
1.1 연구의 배경	1
1.2 기존의 연구	3
1.3 연구의 목적	5
2. 나노 구리합금분말을 혼합한 용액이 열전달에 미치는 영향	6
2.1 나노유체의 열전달 특성	6
2.1.1 금속의 높은 열전도 성질	6
2.1.2 나노유체의 냉각 메커니즘의 제시	9
2.2 실험방법	12
2.2.1 비정상열전법 이론	12
2.2.2 실험장치 및 조건	14
2.3 실험결과 및 고찰	20
3. 분자동역학법을 이용한 기액계면에서의 분자거동에 관한 고찰 · 25	
3.1 분자동역학법	25
3.1.1 Lennard-Jones potential	28
3.1.2 뉴턴의 운동방정식	31

3.1.3 운동방정식의 적분	32
3.2 계산조건 및 방법	34
3.2.1 주기경계조건(Periodic boundary condition)	34
3.2.2 온도제어 방법	37
3.2.3 계산계	39
3.3 계산결과 및 고찰	42
 4. 결론	 53
 참고문헌	 54

List of tables

Table 1 Comparison of thermal conductivities	8
Table 2 Test conditions for heat transfer	18
Table 3 Properties of argon	41
Table 4 Simulation conditions	41

List of figures

Fig. 2-1 Quasi-lattice growing on the surface	11
Fig. 2-2 Heat transport with grown nanometer particles	11
Fig. 2-3 Experimental setup for transient hot wire measurement	15
Fig. 2-4 An electric circuit for amplification	16
Fig. 2-5 Shapes of metal nano-powder	19
Fig. 2-6 The SEM micrograph of CuNi nanopowder	19
Fig. 2-7 Thermal conductivity ratio at 10°C	22
Fig. 2-8 Thermal conductivity ratio at 20°C	23
Fig. 2-9 Thermal conductivity ratio at 50°C	24
Fig. 3-1 Input and output of molecular dynamics method	27
Fig. 3-2 Lennard-Jones potential and intermolecular force between two molecules of argon	30
Fig. 3-4 Arrangement of argon molecules	40
Fig. 3-5 The random motion of a molecule in the vicinity of a liquid-vapor interface	41

interface	45
Fig. 3-6 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of the liquid state	46
Fig. 3-7 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of the vapor state	47
Fig. 3-8 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of the liquid-vapor interface	48
Fig. 3-9 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of moving into the liquid-vapor interface from the vapor state	49
Fig. 3-10 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of moving into the liquid state from the liquid-vapor interface	50
Fig. 3-11 Potential energy of molecules	51
Fig. 3-12 The number of neighboring molecules	52

ABSTRACT

A Study on the Characteristics of Nanofluid on Heat Transfer
and Nano-molecular Motions at the Liquid-Vapor Interface

Hye Min Kim

Department of Mechanical Engineering, Graduate School
Korea Maritime University
Busan, Korea

(Supervised by Jaehyun Jeong)

Traditional heat transfer fluid has a heat transfer characteristic which is worse than that of the solid although many studies have been conducted to increase heat transfer in fluid. One of the various heat transfer enhancement techniques is to suspend fine metallic or nonmetallic solid powder in traditional fluid. Nanofluid is defined as a new kind of heat transfer fluid containing a very small quantity of nanometer particles that are uniformly and stably suspended in a liquid. In this study, CuNi or CuAg nano particles are used to investigate heat transfer enhancement. Through the molecular dynamic(MD) method, molecular behavior was

clarified on an interface to examine the heat transfer mechanism of nanofluid in a molecular dynamics point of view . The result showed that the thermal conductivity of 0.5vol% CuNi nanopowder in ethyleneglycol solution was 124% higher than that of ethyleneglycol solution only. By the numerical analysis for the molecular motions at the liquid-vapor interface, a criterion to distinguish between liquid and vapor was suggested by a potential energy and the number of neighboring molecules. When a molecule moved into a vapor region from a liquid region, the potential energy of a molecule was increased but the number of neighboring molecules was decreased.

1. 서론

1.1 연구의 배경

열전달 물질은 자동차나 항공운송산업에서의 냉각시스템, 건물에서의 순환식 냉난방시스템, 석유화학, 섬유, 제지, 화학, 식품, 산업제조 냉난방시스템 등에서 중요하게 사용되고 있으며, 열이나 냉각유체는 에너지 공급과 생산, 운반과 전자공학을 포함한 많은 산업분야에서 중요하다. 열전달 물질은 산업의 고성능, 고 효율화에 의하여 성능향상이 요구되고 있으며 이러한 유체의 열전도율은 효율적인 에너지 열전달 장치의 개발에 중요한 역할을 하고 있다. 그러나 열전달 상승에 있어서 이전의 연구개발 노력에도 불구하고, 기존의 열전달 유체는 대부분의 고체와 비교하여 좋지 않은 열전달 특성을 가지고 있다. 이러한 낮은 열전도율은 많은 산업분야에서 요구되는 열전달 유체의 개발에 있어서 근본적으로 제약이 되는 조건이다. 그러므로 산업에 있어서 현재 사용되는 것보다 더 높은 열전도율을 가진 진보적인 열전달 유체를 개발하는 것이 경쟁력을 높이기 위해서 매우 필요하다.

실온에서 고체형태의 금속은 유체보다 더 큰 열전도율을 가지고 있다고 알려져 있고, 유체의 열전도율을 개선하기 위하여 부유 상태의 고체 금속입자들을 포함한 액체의 열전도율의 많은 이론적이고 실험적인 연구가 수행되어져왔으나, 부유물의 열전도율에 대한 대부분의 이전의 연구들은 밀리(Mili)나 마이크로(Micro) 크기의 입자들을 포함한 것들에 국한되어 있었다. 그러나 최근에

미세공정기술의 발달로 나노크기의 시스템에서의 유체 유동 및 열적 특성에 대한 관심이 높아지면서 기존의 유체에 나노입자를 부유시킨, 일명 나노유체라 불리는 극도로 고도인 열전달 유체를 만들었으며 나노유체에 관한 연구는 지난 몇 년 동안 증대되어졌다.

고체/액체 부유물의 새로운 부문, 즉 나노유체는 측정된 열전도율이 현존하는 이론들에 의해서 예상된 것보다 더 크게 나왔기 때문에 이론적인 도전을 해볼 만하며, 이러한 나노유체는 열처리 시스템을 위한 차세대 냉각제의 강력한 후보가 되었고, 열전달 상승에 가장 좋은 희망을 비치고 있다. 예를 들어, 실온에서 구리의 열전도율은 물보다는 약 700배 정도 크고, 엔진오일보다는 약 3000배 정도 크고, 금속액체의 열전도율은 비금속액체의 열전도율보다 훨씬 더 크다. 그러므로 부유된 고체 금속입자를 포함하는 유체의 열전도율은 비금속액체의 열전도율보다 훨씬 더 크다는 것을 예측할 수 있다. 또한 열전달은 입자의 표면에서 발생하기 때문에 넓은 표면적을 가지는 입자를 사용하는 것이 바람직하다. 그러므로 대단히 큰 표면적을 가지고 있는 나노입자들은 열전달의 적용에 있어서 좋은 잠재성을 가지고 있다고 말할 수 있다.^[1-3].

1.2 기존의 연구

고체입자를 포함하는 분산의 효율적인 열전도율에 대한 이론적이고 실험적인 많은 연구는 Maxwell 이론 논문이 100년 전보다 더 오래전에 발표된 이래로 행해져왔다^[4]. Maxwell 모델에서 구형의 입자를 포함하는 부유물의 열전도율은 고체입자의 체적비에 따라 증가한다는 것을 보여주고 있으며, 부유물의 열전도율은 입자의 체적에 대한 표면적의 비로 증가한다는 것도 보여주고 있다.

최근에 나노크기의 금속입자를 기존의 유체에 부유시켜 만든 나노유체가 연구되고 있다. 나노유체에 대한 연구는 열전달성을 분석하기 위한 실험적 연구와 나노유체의 열전달 기구를 규명하기 위한 이론적 연구로 구분된다. 우선 실험적 연구를 살펴보면, Xue^[1]과 Yu등^[2]은 나노유체에 들어있는 고체입자와 기본 유체사이에서의 경계면에 대한 영향을 고려하여 나노유체의 열전도에 관한 새로운 모델을 만들었고, Xuan등^[5-7]은 나노입자의 체적비와 열전달의 레이놀즈 수(Reynolds number), 유동특성에 따른 대류열전달의 영향에 대해서 연구하였으며, 나노입자가 들어간 나노유체가 열전달을 개선시키는 이유와 Cu 나노입자를 oil과 물에 넣어서 그 특성을 비교하였다. 또한, 부유된 나노입자의 강화된 열전달을 분석하는 접근방법도 제시하였고, 나노유체의 열전달 메커니즘(Mechanism)을 설명하였다. Eastman등^[8]은 기본 유체인 에틸렌글리콜(Ethylene glycol)에 대략적으로 평균직경이 10nm보다 작은 Cu 나노입자를 0.3vol%의 비율로 섞으면 기존 유체에서 보다 40%까지 증가되었음을 보여주고 있고, Lee 등^[9]은 CuO나 Al₂O₃ 나노입자들로 구성된 나노유체는 더 높은

열전도율을 나타낸다는 것을 입증하고 있다. 또한, Xie 등^[10]에 의하면 에틸렌 글리콜에 분산된 평균직경 35nm의 4vol% CuO 나노입자의 경우에 대략 20% 정도의 열전도율이 증가되었다. Choi등^[11]은 오일에 1.0vol%의 탄소 나노튜브 (Carbon nanotube)를 혼합한 나노유체의 열전도율이 160% 상승됨을 보여주었다. 이상의 실험에 의하면 나노물질의 크기와 종류에 따라 열전달 특성이 변화하지만 열전도율 향상은 명확한 것으로 판단된다.

이론적 연구는 주로 나노유체의 열전도 메커니즘을 규명하기 위한 것으로 경험에 의한 가설과 분자역학에 의한 계산적 연구로 구분하는데, Keblinski등^[12]은 여러 가지 실험과 분자동역학 시뮬레이션(Molecular dynamics simulation)을 통해서 나노유체에서 열전도율의 증가에 대한 네 가지 가능성 있는 해석을 제시하였다. 그것은 입자의 브라운 운동, 액체와 나노입자의 경계면에서 액체의 분자적 수준의 경계면발달과 나노입자의 높은 열전도 특성, 나노입자 클러스터의 영향이다. Choi^[3]는 Batchelor, O'Brien의 이론과 Hamilton, Crosser의 이론을 바탕으로 나노유체의 열전도율에 대해서 연구하였다. 이러한 이론적 해석에도 불구하고 나노유체의 열전달 메커니즘은 아직 명확하게 규명되지 않고 있다.

1.3 연구의 목적

나노유체에 대한 실험적 연구를 통해서 열전도율 향상은 명확한 것으로 판단이 되나 이론적으로 해석하기에는 많은 어려움이 있다. 이것은 나노유체 안에서의 분자들의 운동은 아주 미세한 현상이기 때문에 거시적인 계로부터 유도된 종래의 법칙을 그대로 적용할 수 없다는 것을 의미하며^[13], 관심의 대상이 되는 계가 나노단위의 크기가 되면 기계적, 화학적, 광학적, 열적인 물성은 일반적으로 벌크상태로부터 구한 값과는 판이하게 다르다. 그러나 최근에 와서 컴퓨터의 급격한 성능향상 및 대량보급으로 인하여 분자동역학법 및 몬테-카를로(Monte-Carlo) 전산모사 가상실험기법이 미소계의 특성이나 거동을 파악하기 위한 수단으로서 활발하게 연구되고 있으며, 실제로 실험조건을 적절히 계산에 반영하면 신뢰성 있는 결과를 얻을 수 있다.

본 연구에서는 CuNi합금, CuAg합금 나노금속분말을 에틸렌글리콜 용액에 넣어서 열전도율을 측정하였고, 용액에 대한 나노금속분말의 vol%와 측정온도에 따른 열전달 특성을 분석하였으며, 나노유체의 열전달 메커니즘을 분자동역학적인 견지에서 규명하기 위한 기초단계로 계면에서의 분자거동을 분자동역학법에 의하여 계산 고찰하였다.

2. 나노 구리합금분말을 혼합한 용액이 열전달에 미치는 영향

2.1 나노유체의 열전달 특성

2.1.1 금속의 높은 열전도 성질

일반적으로 기체와 액체의 열전도율은 금속 고체의 열전도율보다 매우 작다. 원자가 일정한 거리 간격을 두고 규칙적으로 배열된 결정체를 가지는 것이 금속 고체이고, 금속의 결정에서 원자의 가장 바깥쪽 전자(외각전자)가 자유롭게 움직일 수 있는 상태이며, 이 외각전자를 제외한 나머지 원자는 일정한 거리 및 간격으로 배열되어 있다. 이 자유로이 움직이는 전자를 자유전자(Free electrons)라고 하며, 음전하를 띠고 있으므로 외부로부터 전압을 걸어주면 일정방향으로 이동할 뿐 아니라, 금속의 양끝에 온도차이가 생기면 전자는 온도가 높은 곳에서 낮은 곳으로 열을 전달한다. 따라서 열에너지의 전달은 자유전자의 이동과 격자 진동이라는 두 가지 효과에 의한 것이다. 그러나 유체상태에서는 분자사이의 간격이 고체 상태에서보다 매우 넓고 분자운동이 고체 상태에서보다 더 불규칙적이므로, 열에너지 전달은 덜 효과적이다^[14].

Table 1은 금속과 유체의 열전도율을 비교하고 있다. 은(Ag)의 열전도율을 보면 에틸렌글리콜의 열전도율보다 약 1700배 정도 크다는 것을 알 수 있고,

구리(Cu)의 경우는 에틸렌글리콜에 비하여 약1600배나 큰 열전도율을 가지고 있으며 니켈(Ni)은 약 360배 정도 열전도율이 크다. 따라서 나노금속분말에 의한 열전도 성질은 향상된다고 예측할 수 있다.

Table 1 Comparison of thermal conductivities

Materials	Thermal conductivity (W/mK)	Conductivity ratio
Ag	429	1716
Cu	401	1604
Ni	90.7	363
Ethylene glycol	0.25	1

2.1.2 나노유체의 냉각 메커니즘의 제시

나노유체는 나노크기의 고체분말을 혼합한 유체이다. 일반적으로 사용되는 나노입자들의 크기는 1nm에서 100nm정도이고, 액체분자들의 크기는 0.1nm에서 10nm정도이다. 그러므로 나노입자가 부유되어 있는 나노유체에서 나노입자의 크기는 액체 분자의 크기보다 10배 정도 크기 때문에 물질의 일반적인 물성을 나타내는 동시에 분자나 원자 고유의 성질을 갖게 되는데, 특히 유체에 혼합하는 경우 중력의 작용에 상관하지 않고 무작위로 움직이는 브라운 운동과 같은 거동을 예측할 수 있다. 나노분말의 이러한 독특한 성질들은 나노유체의 열전달 향상에 복합적인 영향을 미치는 것으로 생각된다. 하지만 나노크기의 분말을 생산하거나 실험적으로 분석하는 것 자체가 어렵고 분자역학적인 해석은 한계가 있으며 고전이론에 의한 모델수립도 많은 문제를 갖고 있다. 이러한 복잡한 현상임에도 불구하고, 본 연구에서는 나노금속분말의 불안정한 특성과 분자거동 등을 종합적으로 고찰하여 다음과 같은 나노유체의 열전달 메커니즘을 제시하고자 한다.

첫째, 극저온 영역에서 열전달을 주도하는 자유전자가 나노유체에 다량 존재함으로써 열전달 특성을 향상시키는 것이며, 둘째는 금속입자 표면의 홀로 있는 전자들(Unpaired electrons)이 유체분자를 끌어당겨 마치 금속입자와 유사한 밀집된 구조를 형성하는 Quasi-lattice 성장에 의한 열전달 촉진 현상이며, 셋째는 성장된 금속입자들이 브라운 운동에 의하여 상호 충돌함으로써 직접 금속 간 열전달현상이다. 본 논문에서는 이를 Macroscopic lattice vibration이라 칭한다.

Fig. 2-1은 액체 분자들이 나노금속분말 표면 주위에서 Quasi-lattice를 이룬다고 가정하였을 때를 그림으로 나타낸 것이다. 이 그림은 홀로 있는 불안정한 전자들이 나노크기의 입자들 표면에 분포되어 있으며 그것들이 액체 분자들을 끌어당겨 마치 액체 분자들도 고체와 같이 격자를 생성하고 있는 모습을 보여주고 있다. 이런 현상들로 인하여 표면층의 분자 구조는 벌크 상태의 액체에서보다 더 질서 있는 구조를 이룰 것이고 계면을 이루는 액체의 열전도율이 벌크상태에 있는 액체의 열전도율보다 더 높게 나타난다. 이렇게 성장한 나노입자들이 유체에 포함되면 Fig. 2-2와 같이 열전도율을 증가시킨다. 좌측 고온 벽에서 유체를 지나는 동안 열전달이 잘 이루어지지 않아 급격한 온도 변화를 나타낸 후 나노입자 주변의 성장영역에 들어가면 조밀구조의 유체분자들에 의하여 열전달이 향상되며, 이후 금속입자 영역에서도 더욱 빠른 열전달을 나타냄으로써 전체적인 열전달 속도를 증가시킨다. 또한 거시적인 격자운동인 브라운 운동을 하면서 마치 금속 열전달의 Phonon 운동처럼 고체와 고체들의 직접적인 접촉에 의하여 열전달 성능을 향상시킨다.

상기의 메커니즘이 종합적으로 작용하여 나노유체의 열전달성이 크게 향상되는 것으로 생각된다.

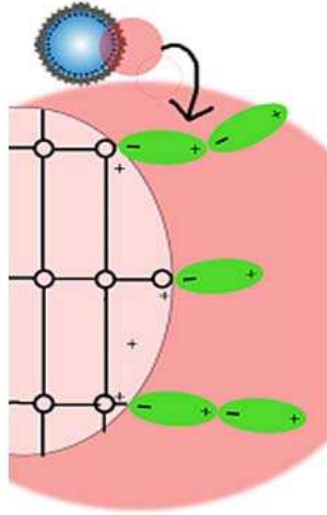


Fig. 2-1 Quasi-lattice growing on the surface

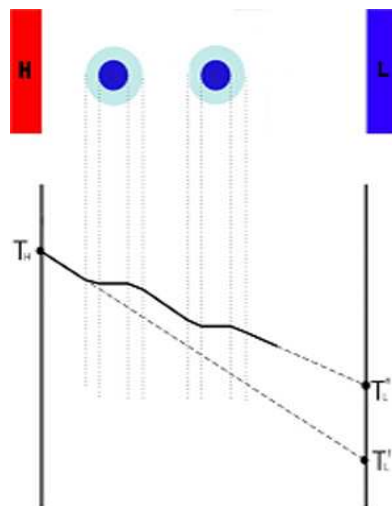


Fig. 2-2 Heat transport with grown nanometer particles

2.2 실험 방법

2.2.1 비정상열선법 이론

유체의 열전도율 측정에는 비정상열선법(Transient hot wire method)을 이용한다. 이 방법은 정상상태법에서 문제가 되는 측정유체내의 대류효과가 나타나지 않고 기초적인 전기지식만 있으면 비교적 간단히 장치를 구성하여 측정할 수 있다는 장점을 가지고 있다.

비정상열선법은 시간의 함수를 고려하면서 열선을 이용하여 유체의 열전도율을 측정하는 것인데, 실험으로부터 측정되는 값은 열선의 전위차이므로 식(2-1)과 같이 전위차를 저항의 값으로 바꾸어 주어야 한다.

$$R_4 = R_2 \frac{\left(\frac{V}{V_0} + \frac{R_3}{R_1 + R_3} \right)}{\left(1 - \frac{V}{V_0} - \frac{R_3}{R_1 + R_3} \right)} \quad (2-1)$$

식(2-1)에서 V 는 A/D 변환기에 출력되는 전위차이고, V_0 는 순간적으로 넣어주는 초기의 전압이며, 구하고자 하는 열선의 저항은 R_4 이다.

열선의 온도증가 또한 직접 측정할 수 없기 때문에 식(2-1)로부터 나온 저항을 온도로 환산해야 한다. 이것은 열선의 온도-저항관계식인 식(2-2)를 이용하여 변환해 줄 수 있다.

$$T_4 = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{R_4}{R_0} - 1 \right) \quad (2-2)$$

식(2-2)에서 α 는 선저항계수로 열선의 종류에 따라 각각 다른 값을 지니고, R_4 는 식(2-2)에 의해서 변환된 저항의 값이며, R_0 는 온도가 0℃일 때의 백금선의 저항이다. 이 식에서 나온 온도의 변화로 식(2-3)과 같이 열전도율을 구할 수 있다.

$$k = \frac{q}{4\pi(T_2 - T_1)} \ln \left(\frac{t_2}{t_1} \right) \quad (2-3)$$

식(2-3)은 푸리에 법칙(Fourier's law)으로부터 유도된 것이며, k 는 열전도율이고, q 는 단위길이 당 발열량이다. T_1 과 T_2 는 t_1 과 t_2 에서의 온도이다.

2.2.2 실험장치 및 조건

나노합금용액의 열전도율 측정은 2.2.1절에서 언급한 비정상열선법을 이용하였다. Fig. 2-3은 휘스톤브릿지(Wheatstone bridge)를 이용한 비정상열선법 실험장치이며, R_1 과 R_2 는 고정저항으로 각각 15.4Ω 으로 주었다. R_3 는 가변저항이며, R_4 에 사용한 열선은 백금선으로 그 선의 두께가 $25\mu\text{m}$, 길이는 10cm 이다. 여기서 나온 데이터는 A/D 변환기로 변환하여 PC에 저장하였다. R_4 에 해당하는 백금선은 나노금속분말이 들어있는 나노유체가 담겨져 있는 메스실린더에 잠겨 있다. 실험의 온도조건에 따라서 초기온도를 유체와 동일하게 유지시켜 주고 순간적으로 전압을 넣어서 열선이 열을 받게 하여 열선의 전위차를 구하였다.

나노유체가 담긴 메스실린더는 항온수조에 의해서 온도가 일정하게 유지되도록 하였으며, 열선의 전위차는 어느 정도의 오차를 없애기 위하여 Fig. 2-4에 보이는 증폭회로를 이용하여 그 값을 100배로 증폭시켰다.

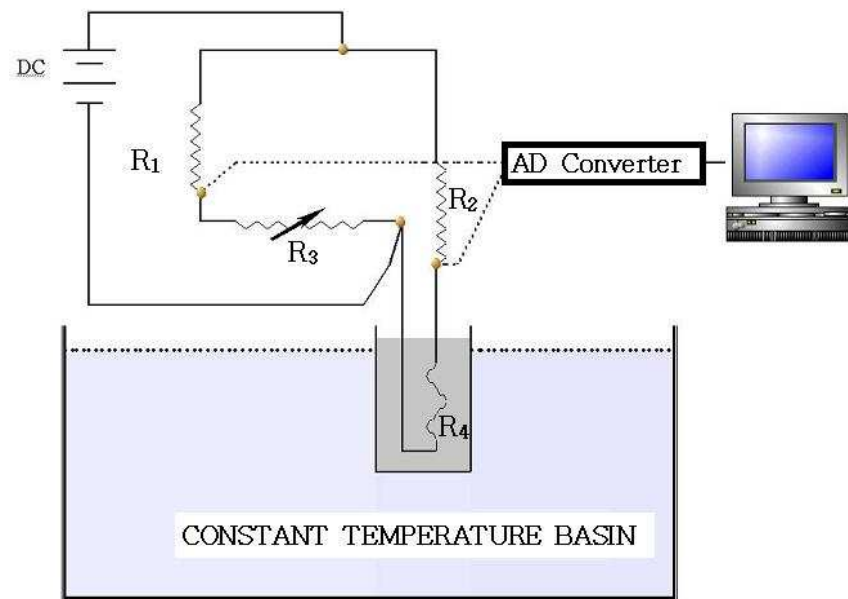
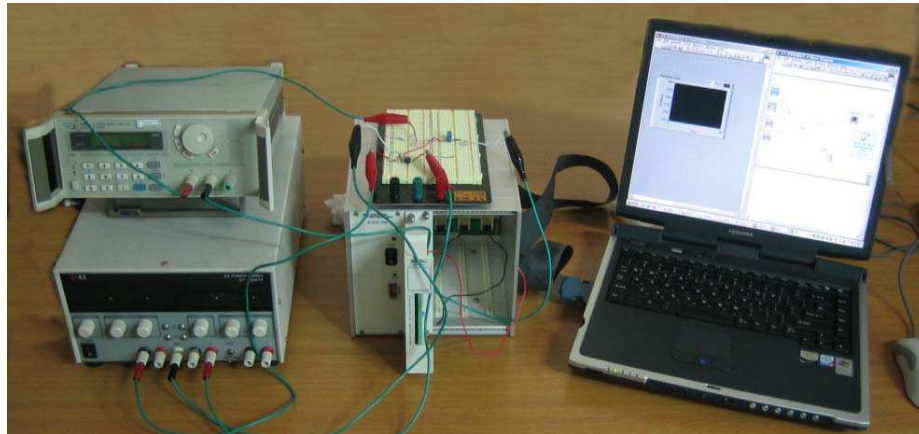


Fig. 2-3 Experimental setup for transient hot wire measurement

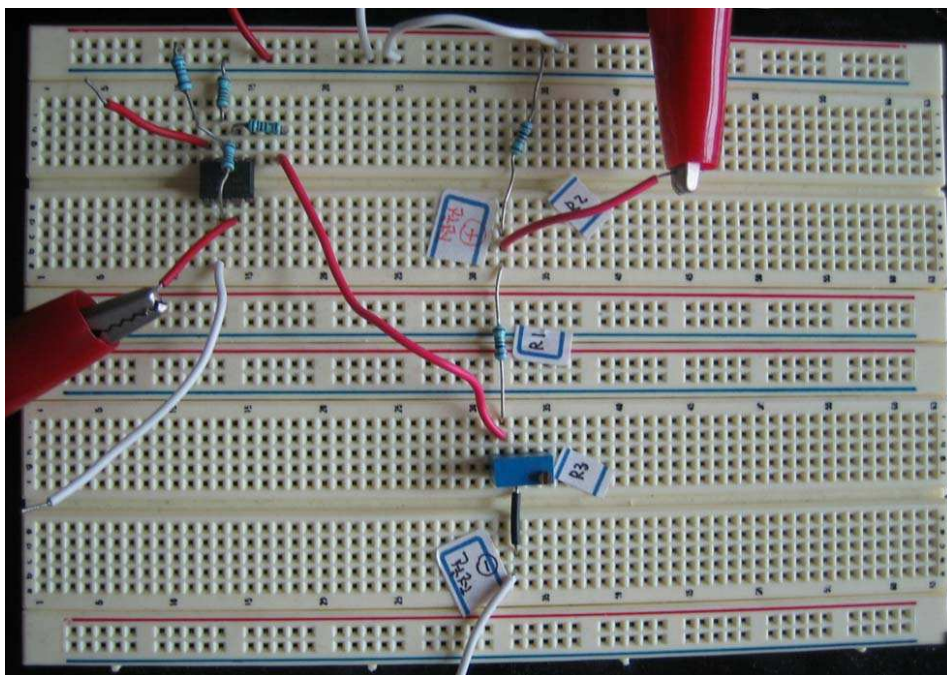


Fig. 2-4 An electric circuit for amplification

본 실험에서 적용한 실험조건은 Table 2와 같다. 나노구리합금분말 CuNi와 CuAg를 사용하였으며, CuNi는 0.2, 0.3, 0.4, 0.5vol%인 경우에 대해서 실험하였고, CuAg는 0.025, 0.050, 0.100vol%로 실험조건을 주었다. 유체의 온도는 10℃, 20℃, 50℃로 주었다.

원료는 13.56MHz의 고주파 유도로 RF플라즈마 반응로 시스템을 이용하여 제조한 분말이다. 이렇게 하여 생산된 나노금속분말의 형상은 Fig. 2-5와 같다. 중심에 Cu원자가 있고 그 주위에 Ag원자 혹은 Ni원자가 둘러싸고 있는 합금분말형태이며 평균 직경은 30nm이다. SEM 현미경으로 관찰한 CuNi 나노입자는 Fig. 2-6과 같다.

Table 2 Test conditions for heat transfer

	CuNi	CuAg
Averaged nanoparticle diameter(nm)	30	30
Volume percent(%)	0.2 0.3 0.4 0.5	0.025 0.050 0.100
Temperature range(℃)	10 20 50	10 20 50
원료 제조법	RF 플라즈마	
용액	Ethylene glycol	

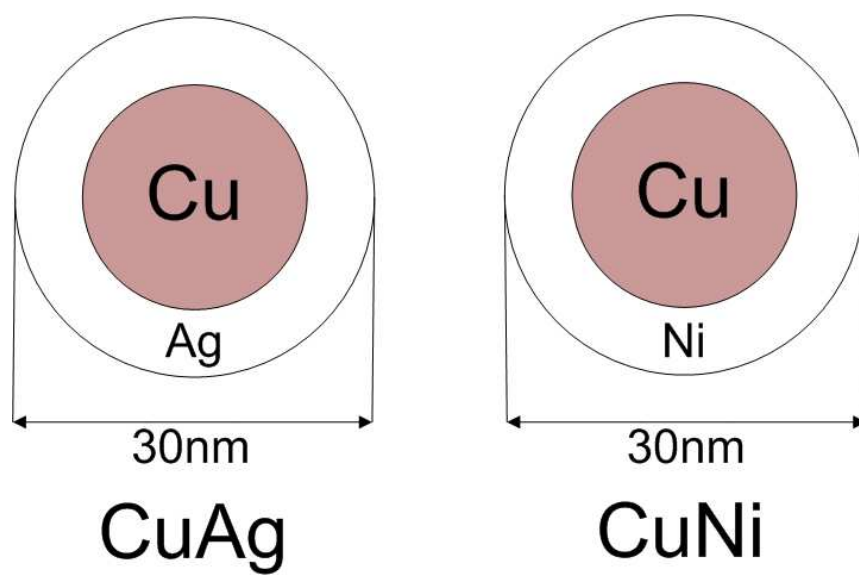


Fig. 2-5 Shapes of metal nanopowder



Fig. 2-6 The SEM micrograph of CuNi nanopowder

2.3 실험결과 및 고찰

CuNi, CuAg의 나노구리합금분말을 넣은 에틸렌글리콜에 잠겨있는 백금선의 저항의 변화를 측정하여 그것을 온도변화로 바꾸어 열전도율을 구하였다.

Fig. 2-7은 온도 10 °C일 때 CuNi와 CuAg 나노분말이 들어있는 에틸렌글리콜에서의 백금선의 vol%에 따른 열전도율비의 변화를 나타낸 그래프이다. 열전도율 비는 에틸렌글리콜만을 사용하였을 경우의 열전도율(k_l)에 대한 나노구리합금분말을 넣은 에틸렌글리콜 나노유체(k_n)의 열전도율의 비로 나타내었다. 0.1vol%만큼 CuAg 나노구리합금분말을 첨가하였을 경우에는 기존의 유체에서보다 열전도율이 약 1.18배 커짐을 볼 수 있다. 또한, 0.5vol%의 CuNi 나노구리합금분말을 첨가한 경우에는 기존의 유체보다 약 1.28배 큰 열전도율을 나타낸다. CuNi와 CuAg 두 가지 경우를 가지고 열전도율을 비교해 보면 Table 1에서 볼 수 있듯이 은의 열전도율이 니켈의 열전도율보다 약 4배정도 더 크기 때문에 CuNi 나노분말을 첨가한 유체에서보다 CuAg 나노분말을 첨가한 유체에서 열전도율의 증가량이 더 큰 것을 볼 수 있다.

Fig. 2-8은 초기 온도가 20°C 일 때 나노크기의 CuNi와 CuAg 분말이 들어있는 에틸렌글리콜에서의 백금선의 vol%에 따른 열전도율의 비를 나타낸 것이다. 이 그림에서 보면 CuAg 나노구리합금분말을 0.1vol%만큼 넣었을 때에는 열전도율의 비가 약 1.27정도이고, 0.5vol%만큼의 CuNi 나노구리합금분말을 넣은 경우에는 열전도율의 비가 약 1.24정도이다. 여기에서도 마찬가지로 나노구리합금분말을 넣은 유체가 기본 유체에서보다 열전도율이 크다는 것을 알

수 있다. 또한, CuAg 나노구리합금분말을 넣은 유체가 CuNi 나노구리합금분말을 넣은 유체보다 열전도율의 증가가 크다는 것도 확인할 수 있다.

Fig. 2-9는 Fig. 2-7, Fig. 2-8과 마찬가지로 vol%에 따른 열전도율의 변화를 초기온도가 50℃일 경우에 대해서 보여주고 있는 그래프이다. CuAg 나노구리합금분말이 0.1vol% 정도 들어갔을 경우에 약 1.05정도의 열전도율 비를 보여주고 있으며, CuNi 나노구리합금분말이 에틸렌글리콜에 0.5vol%정도 첨가된 경우에는 약 1.20배 정도 열전도율이 증가했음을 알 수 있다.

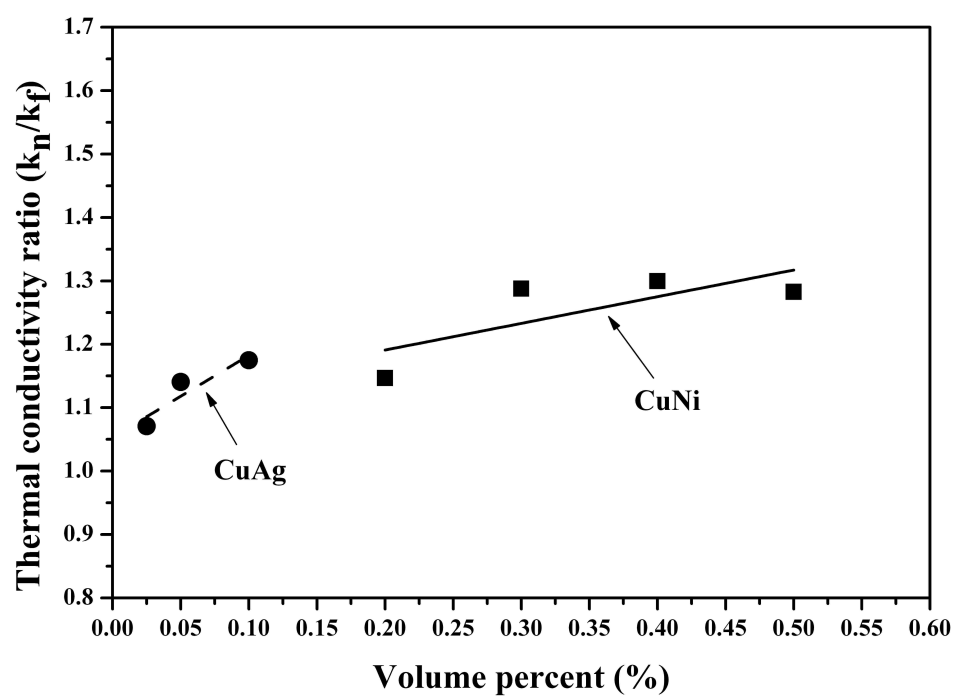


Fig. 2-7 Thermal conductivity ratio at 10°C

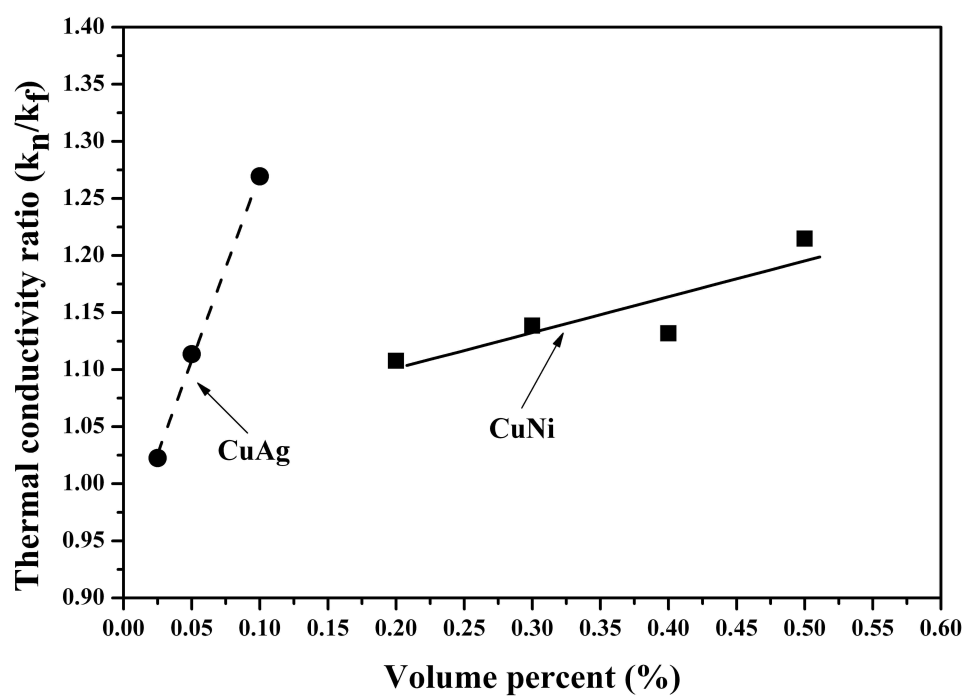


Fig. 2-8 Thermal conductivity ratio at 20°C

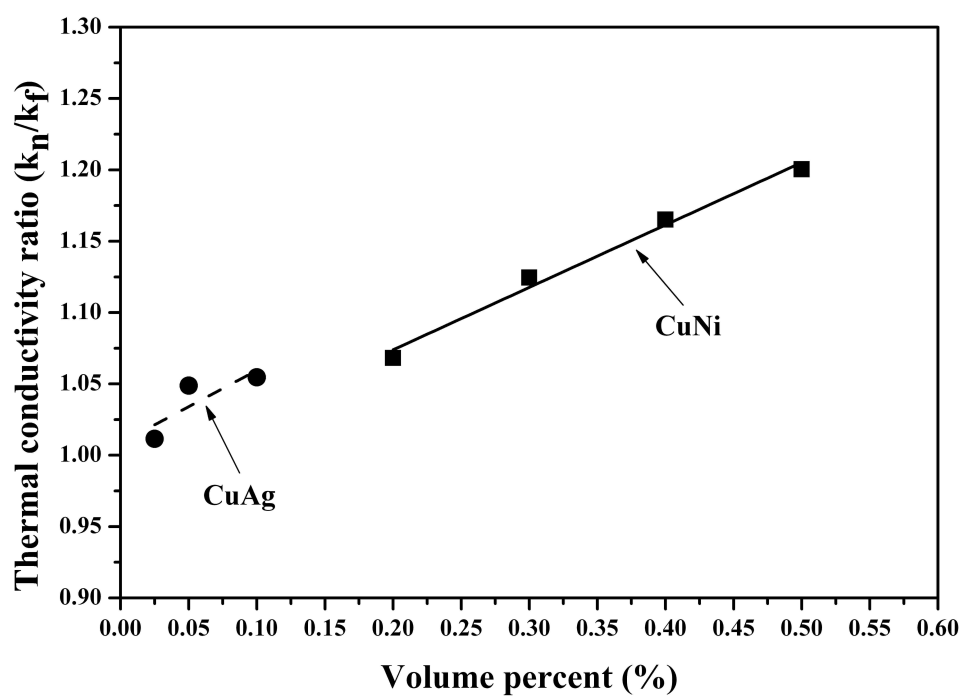


Fig. 2-9 Thermal conductivity ratio at 50°C

3. 분자동역학법을 이용한 기액계면에서의 분자거동에 관한 고찰

3.1 분자동역학법

분자는 물질의 특성을 주는 기본단위이다. 동역학은 힘과 물체의 운동상태와의 관계를 연구하는 것이다. 따라서 분자동역학은 한마디로 이러한 분자들간의 힘에 의한 분자들의 운동을 연구하여 물질의 거시적 성질을 살펴보는 것이라 할 수 있다. 분자동역학에서는 분자들이 변하거나 깨어지지 않고 그 자체로 존재한다고 가정하고, 뉴턴(Newton)의 운동방정식에 기초하여 다 체계의 결정론적 운동방정식을 수치 해석적으로 풀어서, 그 결과로부터 구해진 입자의 궤적을 통계 처리함으로써 물리적 성질이나 미시적인 구조에 대한 정보를 주는 방법이다.

Fig. 3-1에서는 분자동역학법의 입력정보와 출력정보를 보여준다. 입력정보로서는 원자 간 또는 분자 간에 상호 작용하는 힘을 포텐셜 함수로 설정한다. 또 특히 열역학적 평형상태의 성질에 흥미 있는 경우는, 온도나 압력 등의 물리적인 구속조건을 설정한다. 이 조건 아래에서, 이상적으로는 상당히 많은 입자계의 운동방정식을 상당히 긴 시간에 걸쳐 풀면 그 계의 열평형 상태에서 기대되는 분포에 가까운 상태가 실현된다. 이때 얻어지는 각 시각에서의 원자의 위치좌표를 통계 처리하면, 열역학적 성질이 얻어진다. 또 각 시각에서 원

자의 위치좌표와 속도를 통계 처리하면, 동역학적 성질이나 분광학적 성질이 얻어진다. 분자동역학 시뮬레이션에서는 n 개의 독립된 원자로 구성된 계에 대하여 고전역학을 적용하여 각 원자의 위치와 운동량을 시간에 대한 함수로 계산하므로 매 시간에 따라 변하는 계의 동적인 움직임을 어떤 제약도 부여하지 않고 직접 구하는 것이 가능하며, 평형상태의 성질은 충분히 긴 시간의 시간 평균을 계산함으로써 도출할 수 있다^[15].

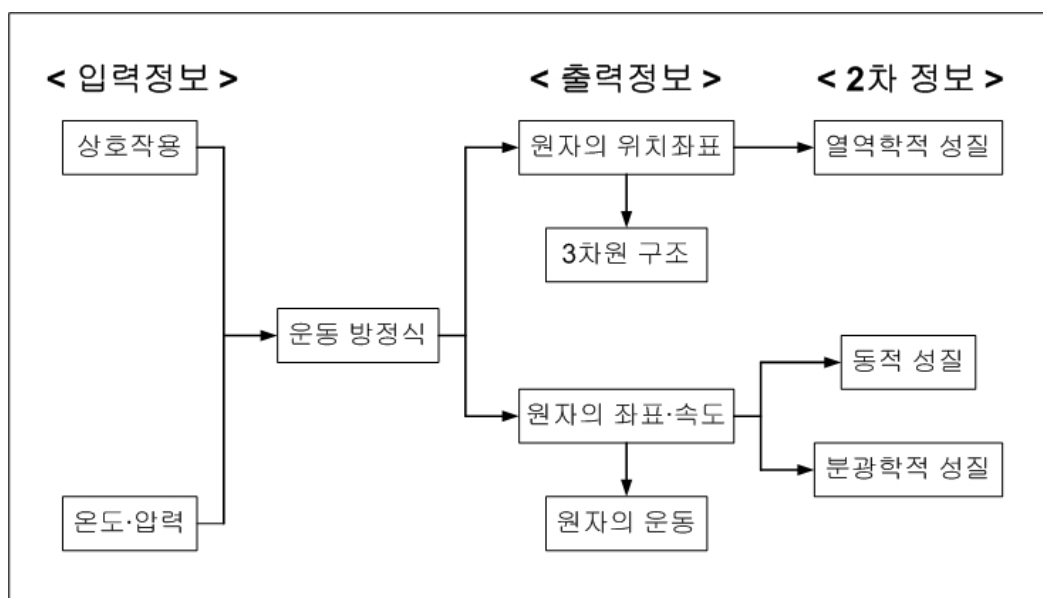


Fig. 3-1 Input and output of molecular dynamics method

3.1.1 Lennard-Jones potential

분자동역학법은 원천적으로 분자 혹은 입자의 운동궤적만을 제공할 뿐이고, 이들 계산치로부터 계의 특성이나 물성 등을 직접적으로 구할 수는 없다. 즉 이는 관찰대상이 되는 계의 성질을 알기 위해서는 운동궤적을 후처리해야 함을 의미한다.

분자궤적을 계산하기 위해서는 분자상호간에 작용하는 힘, F 가 우선적으로 주어져야만 한다. 본 연구에서는 아르곤을 그 대상으로 하였으며, 아르곤과 같은 불활성 물질의 경우에는 분자들 간의 상호작용은 Lennard-Jones의 12-6 포텐셜에 의해 신뢰성 있는 결과를 얻을 수 있음이 잘 알려져 있다.

Lennard-Jones 포텐셜은 원자 사이에서 순간적으로 쌍극자를 상대 원자에 유도하여 발생되는 힘과 거리의 거듭제곱에 역비례하는 척력으로 구성된 함수이다. 이것은 두 분자가 서로 가까이 있을 때에는 서로 밀어내는 힘과 어느 정도 떨어져 있을 때에는 서로 끌어당기는 힘을 모두 고려한다^[16-18].

Lennard-Jones 포텐셜은 아래 식(3-1)과 같다.

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (3-1)$$

위의 식에서 $\phi(r)$ 은 두 개의 분자 간에 작용하는 포텐셜이고, r 은 분자간의 거리, σ 는 분자 직경, 그리고 ε 은 포텐셜 에너지가 최소일 때의 값으로 포텐셜 웰의 깊이(Depth of potential well)를 의미한다. 분자간의 힘은 포텐셜을

r 에 대해서 미분함으로써 얻어질 수 있으므로 분자간의 상호작용력은 최종적으로 식(3-3)과 같이 표현된다.

$$F = - \frac{d}{dr} \phi(r) \quad (3-2)$$

$$F(r) = 24\varepsilon \left\{ 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \frac{1}{r} \quad (3-3)$$

Fig. 3-2는 두 분자 간의 거리에 따라 작용하는 포텐셜과 힘의 변화를 나타낸다. 분자동역학 계산에 있어서 분자의 수가 커질수록 계산시간은 늘어나며, 이는 계산비용과 밀접한 관계를 갖고 있다. 늘어나는 계산시간을 줄이기 위해서 분자간 상호작용력의 절단거리(Cut-off length)를 사용한다. Fig. 3-2에서 알 수 있듯이 분자간의 상호작용은 거리 r 이 증가할수록 급격하게 감소하고, 약 $r=2.5\sigma$ 이상이 되면 거의 $\phi=0$ 이 되어 상호작용을 무시할 수 있음을 알 수 있다.

따라서 분자간의 상호 작용력을 계산할 때 이 범위 내에 존재하는 주변 분자들만을 고려해도 충분하나 본 연구에서는 기존의 연구경험으로부터 $r=3.5\sigma$ 를 채택하였다^[19].

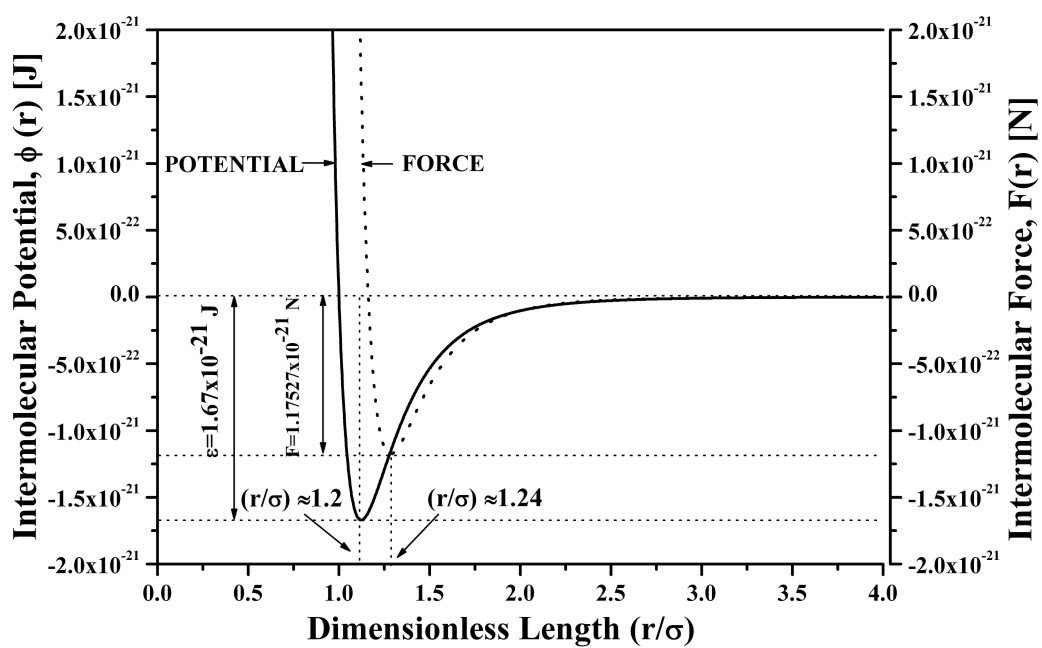


Fig. 3-2 Lennard-Jones potential and intermolecular force between two argon molecules

3.1.2 뉴턴의 운동방정식

뉴턴의 운동해석에서 구 모양 분자의 운동은 외부에서 들어오는 힘에 의해 결정되어지고, 그 운동과 적용된 힘은 뉴턴의 제 2법칙과 관련된다. 뉴턴의 제 2법칙은 물체에 힘이 작용할 때 속도가 어떻게 변하는지를 말해주고 있고, 물체에 작용한 힘이 질량에 반비례한다는 사실과 함께, 가속도의 방향과 힘의 방향이 같다는 것을 말해주고 있다.

분자동역학에서 분자의 움직임은 식(3-4)의 뉴턴의 운동방정식에 의해 결정됨으로써 분자의 새로운 위치를 계산하여 분자의 운동궤적을 구할 수 있게 된다.

$$F = m\ddot{r} \quad \left(\ddot{r} = \frac{d^2r}{dt^2} \right) \quad (3-4)$$

상기의 식에서 m 은 분자의 질량이며, 그것은 위치, 속도, 시간과는 독립적으로 결정되고, t 는 시간을 나타내고, r 은 분자의 위치벡터이다.

3.1.3 운동방정식의 적분

분자동역학법은 크게 2부분으로 분자들의 운동을 계산하여 위상공간에서의 그 궤적을 저장하는 것과 이 저장된 궤적으로부터 연구대상인 물성을 구하기 위한 궤적의 해석을 수행하는 것으로 나누어진다.

분자운동의 위상궤적을 구하기 위해서는 식(3-4)의 운동방정식을 유한차분법(Finite difference method)으로 변경해야한다. 본 연구에서는 오일러법(Euler method)을 사용하였는데, 오일러법은 분자들의 운동을 현재시각의 분자배치상태로부터 포텐셜, 힘, 가속도, 속도를 차례대로 구한 후, 이로부터 다음시각에서의 새로운 분자들의 위치를 계산해 나가는 방법이다. 오일러법은 계산 오차가 Δt^2 에 비례하는 단점을 가지고 있기 때문에 이러한 계산오차를 감소시키기 위해서는 반복계산의 시간간격을 짧게 설정하여 동일한 모의실험 시간에 대해서 보다 많은 계산회수를 요구한다. 그러나 본 연구의 경우 PC를 사용하여 수행한 관계로 프로그래밍이 가장 간단하면서도 계산시간이 짧은 이 방법을 사용하였다.

오일러법에서 시간경과 Δt 에 따른 분자의 새로운 위치 r 과 새로운 속도 u 는 각각 식(3-5)와 식(3-6)에 의해 계산된다^[16-18]. 식(3-5)는 식(3-4)를 시간으로 미분하여 속도의 식으로 나타내었고, 분자의 초기속도와 다음시간에서의 속도를 보여주고 있다.

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \frac{F(t)}{m} \Delta t \quad (3-5)$$

식(3-6)은 식(3-5)의 속도의 식을 시간에 대해 미분하여 분자의 위치와 다음시간에서의 위치를 나타낸 것이다.

$$r(t + \Delta t) = r(t) + u(t) \cdot \Delta t \quad (3-6)$$

3.2 계산조건 및 방법

3.2.1 주기경계조건(Periodic boundary condition)

분자동역학은 일반적으로 몇 백개에서 몇 천개의 원자를 포함한 시스템에 적용된다. 그러한 작은 시스템은 벽을 포함하여 원자들의 상호작용에 의해서 지배된다. 예를 들어, 액체 밀도상태에서 500개의 원자를 가지고 있는 입방체는 약 8.5개의 원자직경의 길이를 가지고 있어야만 하나, 벽과 유체 사이의 상호작용은 각각의 벽으로부터 4에서 10개의 원자직경을 확장시킨다. 이러한 시스템의 계산은 벌크상태의 액체에 관한 정보가 아닌, 고체 표면 근처에 있는 액체의 행동에 관한 정보를 제공할 것이다. 이러한 표면의 영향을 받지 않기 위해서, 주기경계조건을 사용하는 것이다. 분자동역학에서는 원자·분자의 집합체를 취급한다. 당연히 취급하는 원자의 수는 계산기의 능력에 따라 제한된다. 지금까지 계산되고 있는 최고의 원자 수는 백만 개다. 그러나 실제의 물질은 10^{23} 개의 원자·분자로 구성되어 있으므로, 전산시뮬에서 취급되는 유한한 크기와 계에서 표면의 영향이 문제가 된다. 이 영향을 가능한 작게 하기 위해서, 통상적으로 주기경계조건을 사용한다. 이러한 주기경계조건 하에서 운동하는 수백 개 정도의 입자계는 일반적으로 거시적 계의 열역학적 성질 등을 잘 표현하는 것으로 알려져 있다^[18].

Fig. 3-3은 주기경계조건을 만족하며 운동하는 입자들을 모식적으로 나타낸 것이다. 중앙의 사각형 셀을 기본 셀(Basic cell)이라 하며, 기본 셀의 상하좌

우의 셀을 이미지 셀(Image cell)이라고 한다. 분자동역학 시뮬레이션에서 운동방정식은 기본 셀 내에 존재하는 입자에 대해서만 계산하지만, 입자 간에 서로 작용하는 힘은 기본 셀과 이미지 셀을 구분하지 않고 힘이 작용하는 범위 내에 존재하는 모든 입자들에 대해서 계산한다. Fig. 3-3에서 보는 바와 같이 기본 셀 내의 입자의 운동은 이미지 셀에서 똑같이 반복되므로, 시뮬레이션 중에 기본 셀의 밖으로 나가는 입자는 대칭 되는 상대 면으로부터 동일속도로 들어오게 된다. 다시 말해서, 주기경계조건을 사용한 시뮬레이션 계산영역은 단지 벌크상태의 작은 부분만 차지할 뿐이고, 3차원 방향으로 계산영역과 크기와 모양이 동일한 복제영역이 무한히 확장되었다고 가정하므로, 기본 셀 내의 입자수가 적을지라도 이미지 셀에 존재하는 입자들을 모두 시뮬레이션 한 것과 같은 결과를 얻을 수 있다.

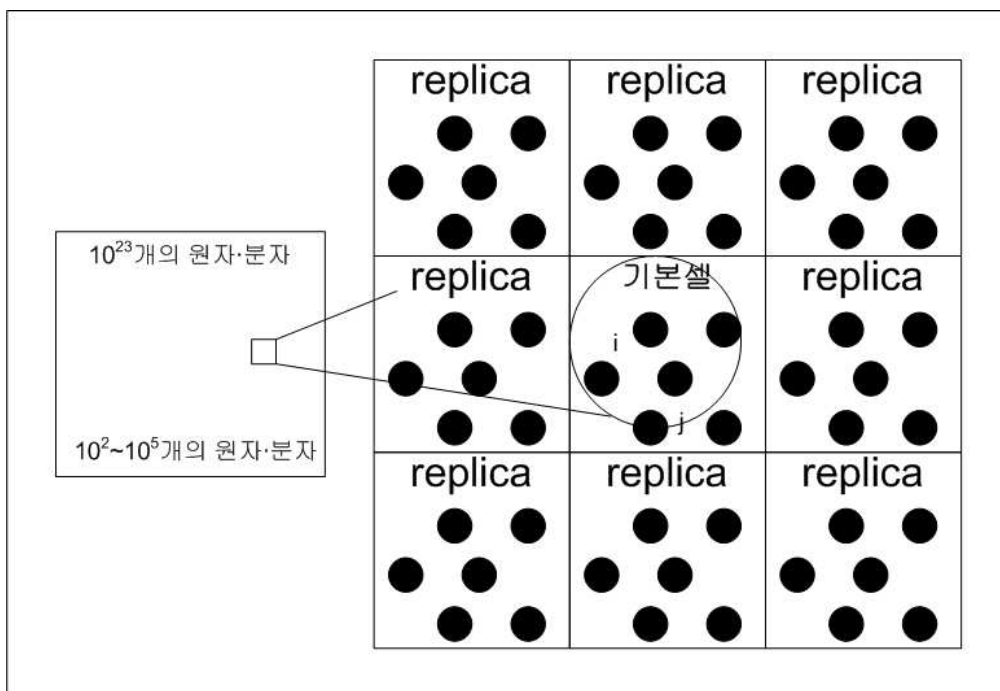


Fig. 3-3 Periodic boundary condition

3.2.2 온도제어 방법

온도는 계의 분자의 평균운동에너지가 서로 같아지면 평균적으로 에너지의 이동이 정지하는 것이고, 두 계가 서로 평형에 이르는 것으로 나타낼 수 있으므로 분자들의 평균운동에너지를 뜻한다.

분자동역학에서 온도의 정의는 위에서 언급한 분자의 운동에너지로부터 계산되어진다. 기액계면에서의 온도는 미시계의 높이방향을 1Å으로 구분하여 각 구간에 존재하는 분자의 운동에너지로부터 온도를 계산하게 되며, 시간단계에 따라 분자가 이동하게 되면, 다음시간 단계에서 구간 안에 포함된 분자들로부터 온도를 다시 계산하게 된다. 이렇게 계산된 온도를 전체시간에 대해 시간 평균한 평균값으로부터 온도를 취한다.

본 연구에서 계산계의 온도제어를 하기 위해서 속도 스케일링법(Velocity scaling method)을 이용하였다. 이 속도 스케일링법은 분자동역학에서 계의 온도를 일정하게 유지시키는 바람직한 방법이며, 각 입자의 속도를 변화시킴으로써 강제적으로 계의 온도를 설정값에 일치시키는 방법이다.

기체분자운동론(Kinetic theory of gas)에서 병진운동에너지로 얻을 수 있는 단원자분자(Mono-atomic molecule)의 온도는 식(3-7)로 표현된다.

$$T_i = v_i^2 \times \frac{m_{AB}}{3k_B} \quad (3-7)$$

식(3-7)에서 v_i 는 분자 i 의 순간 속도이고, m_{AB} 는 본 연구에서 물질로 사용한 아르곤의 질량이며, k_B 는 볼츠만 상수(Boltzmann constant)로 가스 상수(R)를 아보가드로 수(Avogadro's number, N_A)로 나눈 값으로서, 분자들의 가스 상수 값을 의미하며, 식(3-8)과 같이 나타낸다.

$$k_B = \frac{R}{N_A} \quad (3-8)$$

$$= \frac{8.31451 \text{ J/K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}}{6.02214 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}}$$

$$= 1.38066 \times 10^{-23} \text{ J/K}^{-1}$$

분자속도 v_i 를 인위적으로 변경하여 계의 온도를 설정치인 T_{des} 로 유지하는 것은 식(3-9)로 표현할 수 있다. 식(3-9)의 $v_i|_o$ 는 속도 스케일링전의 i 분자의 속도이며, $v_i|_n$ 는 속도 스케일링한 후의 속도를 나타낸다.

$$v_i|_n = v_i|_o \sqrt{\frac{T_{des}}{T_i}} \quad (3-9)$$

3.2.3 계산계

본 연구는 미소계에서의 증기와 액체분자의 특성을 알아보기 위한 것으로 기액계면을 형성시키기 위해서 Fig. 3-4(a)에 보인 것과 같이 $10 \times 10 \times 10$ 의 1000개의 아르곤 분자들을 단순입방구조(Simple cubic lattice)로 배치하였다. 기액계면의 성공적인 형성을 위해서는 분자간의 배치거리가 매우 중요한데, 이는 계산계의 상태에 대응하는 액체밀도의 실험치로부터 적절히 계산할 수 있음이 기존의 연구결과^[20]에 의해 제안되었으며, 본 연구에서도 이를 적용하였다. 계산에 사용된 아르곤의 포텐셜 관련 물성은 Table 3에 나타내었고, Table 4는 시뮬레이션을 위한 계산조건을 나타낸 것이다. 시뮬레이션은 평균 온도가 100 K인 계에 대해서 수행하였고, 이 온도에 대응하는 포화액의 밀도는 $\rho_l = 1311.2 \text{ kg/m}^3$ 이므로, 이로부터 Table 4에 보인 분자간 거리 l 을 구하였다.

Fig. 3-4에 보인 계산계는 건도 $x=0.05$ 를 가정한 계로서 X방향과 Y방향의 길이는 약 36.986 \AA 이고, Z방향의 길이는 약 178.870 \AA 이다. 시뮬레이션은 위에서 언급한 Fig. 3-4(a)와 같이 배치한 아르곤 분자들을 최초 온도제어를 하면서 10만 번의 반복계산을 하여 설정온도로 유지시킨 후, 초기계산과 동일한 시간동안 계를 완화시켜 평형상태에 도달시켰다. 평형상태에 도달시킨 아르곤 분자들의 배치상태는 Fig. 3-4(b)와 같다. 평형상태에 도달시킨 후 이어서 2만 번의 반복계산을 수행한 운동궤적으로부터 나온 결과를 고찰하였다.

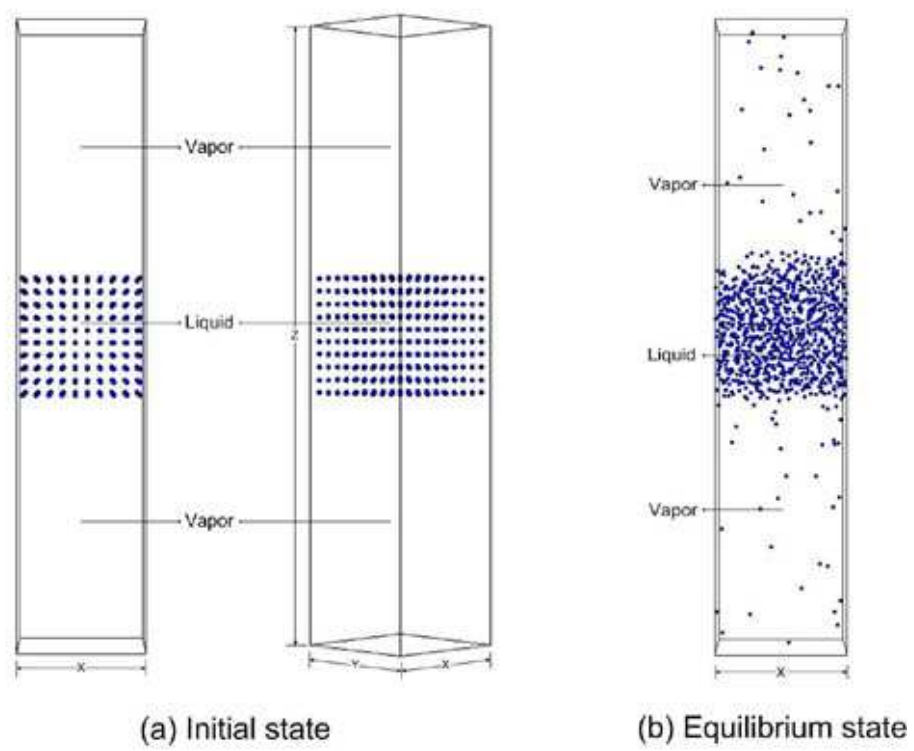


Fig. 3-4 Arrangement of argon molecules

Table 3 Properties of argon

Mass of argon (m)	6.634×10^{-26} kg
Diameter of argon molecule (σ)	3.4×10^{-10} m
Depth of potential well (ε)	1.67×10^{-21} J

Table 4 Simulation conditions

Total number of molecules (N)	1000 EA
System average temperature (T)	100 K
Intermolecular distance (l)	3.6986×10^{-10} m
Quality of mixture (x)	0.05
Time interval (Δt)	0.005 ps (=5 fs)
Cut-off length (R)	3.5σ

3.3 계산결과 및 고찰

현재까지 분자동역학을 이용한 전산모의실험에서는 액체와 증기상태를 정의하는 명확한 구분이 확립되어 있지 않지만, 본 연구에서는 물리적인 직관에 기초하여 특정 분자의 포텐셜 에너지와 그 분자 주위에 있는 다른 분자들의 수를 이용하여 증기 및 액체의 상태를 구분하였다.

만일 특정 분자가 증기로 구분된다면 주위의 분자수는 적을 것이고, 따라서 포텐셜 에너지는 증가하며, 액체로 구분된다면 그 반대가 될 것이다. 주위에 있는 분자수로 구분하는 경우에는 공간범위의 설정치에 따라 주위 분자수가 달라지는데, 본 연구에서는 3.5σ 와 1.4σ 의 두 가지 경우에 대해서 계산하였다. $r=1.4\sigma$ 는 S. Maruyama 등^[21]이 액적상태의 아르곤에 대해서 사용한 값이며 $r=3.5\sigma$ 는 Table 2에서 보인 분자간 상호작용의 절단거리(Cut-off Length)이다.

고체와 달리 유체의 분자운동은 Fig. 3-5에 보인 것처럼 그 특성상 무질서(Random)한 속성을 보이기 때문에 분자들의 거동과 포텐셜 에너지변화를 살펴보기 위하여 액체영역(No. 177), 증기영역(No. 736), 기액계면에 위치하는 분자(No. 53)와 증기영역에서 기액계면(No. 479), 또 기액계면에서 액체영역으로 이동하는 분자(No. 157)의 다섯 개의 분자를 선택하여 해석결과를 고찰하였다.

Fig. 3-6은 액체영역에서 대부분의 시간을 보낸 후 기액계면영역으로 이동하는 분자(No. 177)의 포텐셜 에너지(실선)와 $r=3.5\sigma$ 내에 있는 주위 분자수

(점선)의 변화를 보여주는 것으로서 주위 분자는 평균적으로 135개 정도이며, 포텐셜 에너지는 $-1.7 \times 10^{-20} \text{ J}$ 정도이다. 그래프상에서 20ps와 50ps에서 급격히 포텐셜 에너지가 증가한 것은 특정 분자와 매우 접근하여 분자 간 충돌이 발생했음을 의미한다.

Fig. 3-7은 증기영역에 존재하는 분자(No. 736)의 예를 보인 것으로서 실선과 점선의 의미는 Fig. 3-6의 경우와 동일하다(Fig. 3-8~3-10까지 동일). 초기에 포텐셜 에너지는 거의 0에 가까우며 이는 절단거리 $r=3.5\sigma$ 내에 다른 분자가 약 2~3개정도 존재함을 의미하며, 55ps부터 $-3.0 \times 10^{-21} \text{ J}$ 정도의 값을 보이는 것은 주위 분자수가 평균적으로 약 5개 정도가 분포함을 나타내는 것이다. 따라서 증기영역에서는 0에서 최대 10개 정도의 분자가 주위에 존재함을 알 수 있다. 그리고 90ps에서 포텐셜 에너지가 급격히 증가한 것은 Fig. 3-6에서처럼 분자간 충돌을 의미한다.

Fig. 3-8은 기액계면에서 움직이는 분자(No. 53)에 대한 것으로서 평균적으로 $-1.0 \times 10^{-20} \text{ J}$ 의 포텐셜 에너지를 나타내고 30에서 100개 정도의 주위분자수를 가짐을 알 수 있다. Fig. 3-6 및 Fig. 3-7의 경우와 달리 액체와 증기의 계면상에 위치하는 계로 포텐셜 에너지와 주위 분자수의 변화가 급격함을 알 수 있는데, 이는 액체영역과 증기영역을 수시로 이동하기 때문이다.

Fig. 3-9는 증기영역에서 기액계면으로 움직이는 분자(No. 479)로 0에서 $-3.0 \times 10^{-21} \text{ J}$ 의 포텐셜 에너지를 나타내는 증기영역은 5개 이하의 주위 분자수를 가지며, 90ps부터는 분자가 기액계면으로 움직이고 있음을 보여주고 그 때의 주위 분자수는 40에서 100개정도이다.

Fig. 3-10은 기액계면에서 액체영역으로 이동하는 분자(No. 157)로서 30ps

까지는 $-1.0 \times 10^{-20} \text{J}$ 의 평균값을 가지며 이 때 주위 분자수는 40에서 100개 정도이고, 이는 분자가 기액계면에 존재함을 의미한다. 30ps부터는 약 $-1.7 \times 10^{-20} \text{J}$ 의 포텐셜 에너지를 가지며, 주위 분자수는 135개 정도이다.

Fig. 3-11(a)와 (b)는 앞에서 언급한 다섯 개의 분자에 대한 포텐셜 에너지를 비교한 것이다. Fig. 3-11(a)는 기액계면, 기액계면에서 액체영역, 증기영역에서 기액계면으로 움직이는 분자들에 대한 것으로 기체영역으로 움직일수록 포텐셜 에너지의 증가를 보여주고, Fig. 3-11(b)는 0에서 $-3.0 \times 10^{-21} \text{J}$ 의 포텐셜 에너지를 나타내는 증기영역과 약 $-1.7 \times 10^{-20} \text{J}$ 의 포텐셜 에너지를 가지는 액체영역을 비교한 것이다.

Fig. 3-12(a)와 (b)는 Fig. 3-11(a)와 (b)에서 언급한 분자들의 주위 분자수에 대한 것이다. Fig. 3-12(a)는 포텐셜 에너지와는 반대로 액체영역으로 갈수록 더 많은 분자수를 나타내고 있다. 증기영역과 액체영역에 각각 존재하는 분자의 주위 분자수를 나타낸 Fig. 3-12(b)는 더 높은 포텐셜 에너지를 보여주는 증기영역과 평균적으로 135개 정도의 더 많은 주위 분자수를 보여주는 액체영역을 볼 수 있다.

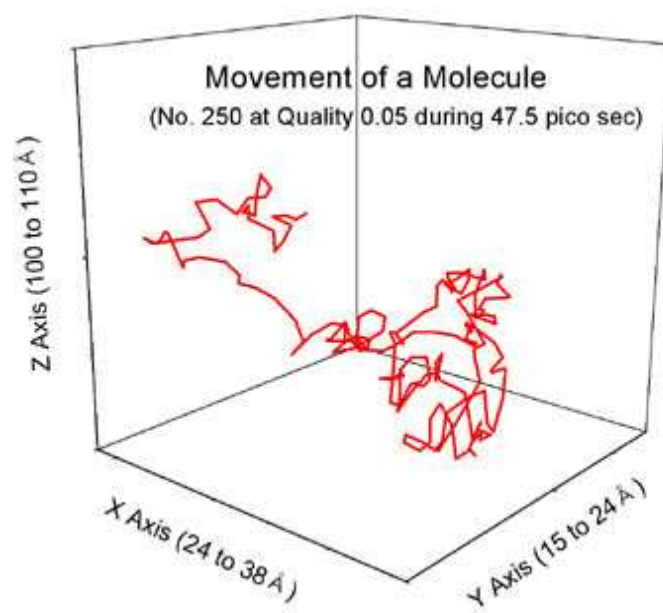


Fig. 3-5 The random motion of a molecule in the vicinity of a liquid-vapor interface

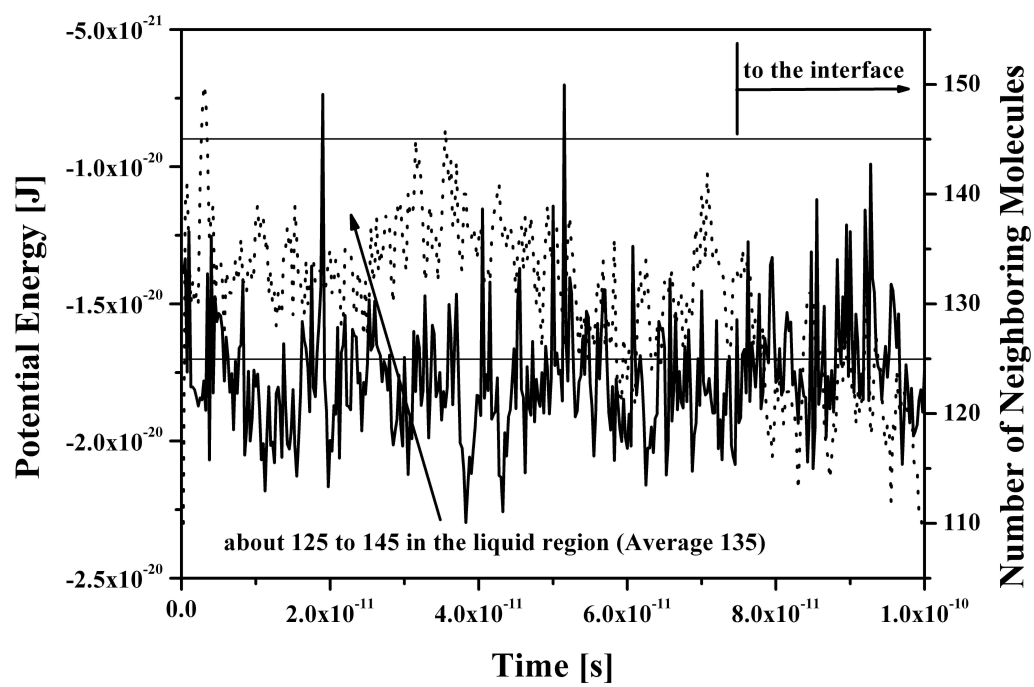


Fig. 3-6 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of the liquid state

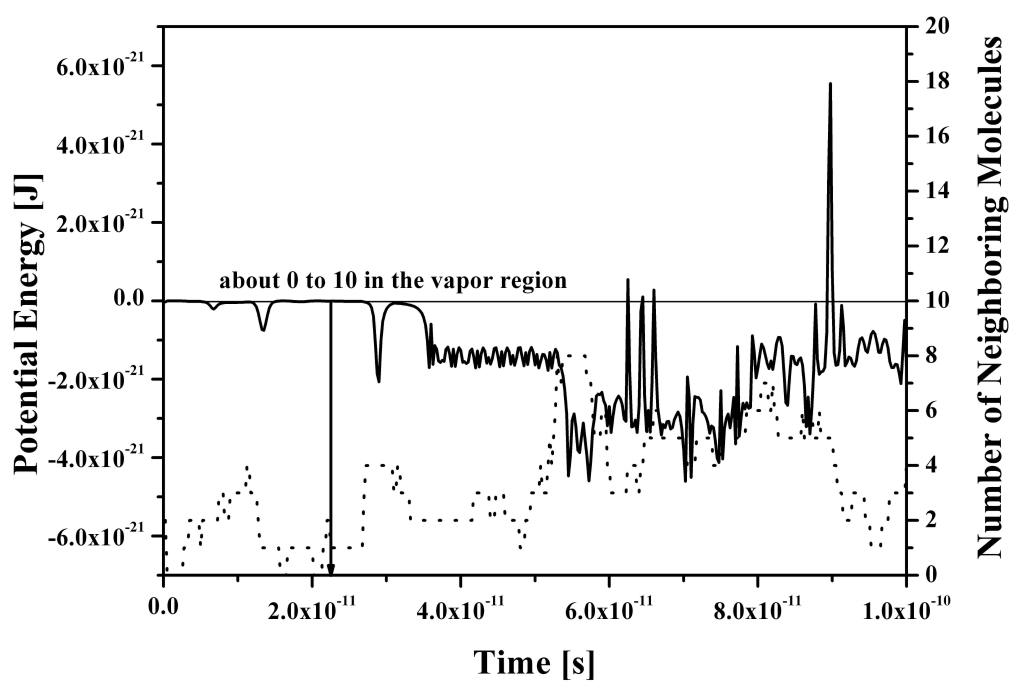


Fig. 3-7 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of the vapor state

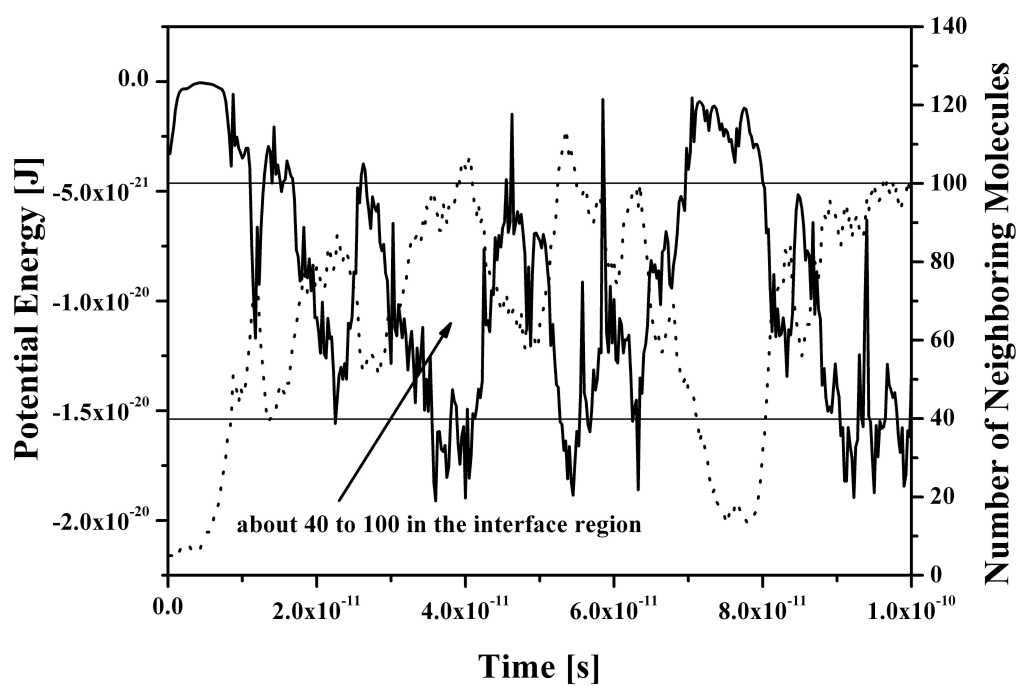


Fig. 3-8 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of the liquid-vapor interface

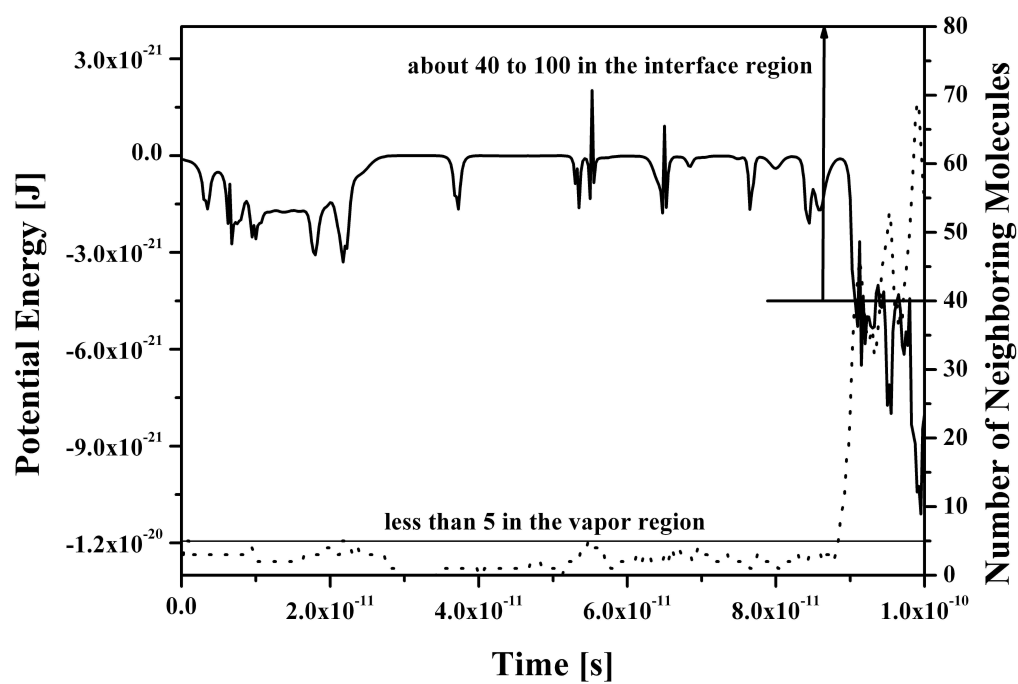


Fig. 3-9 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of moving into the liquid-vapor interface from the vapor state

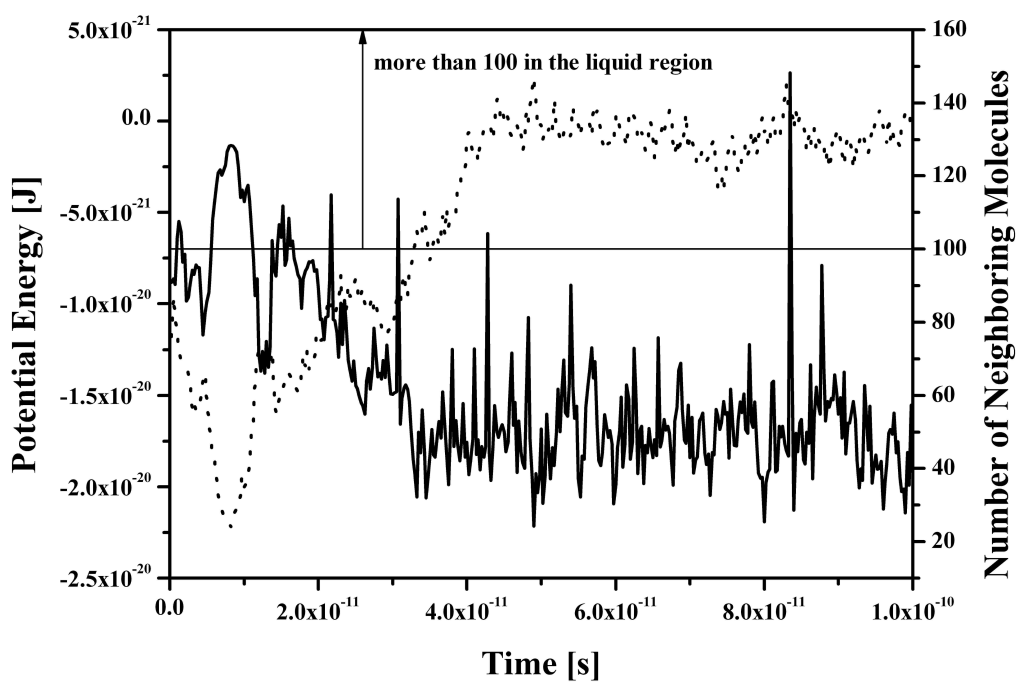
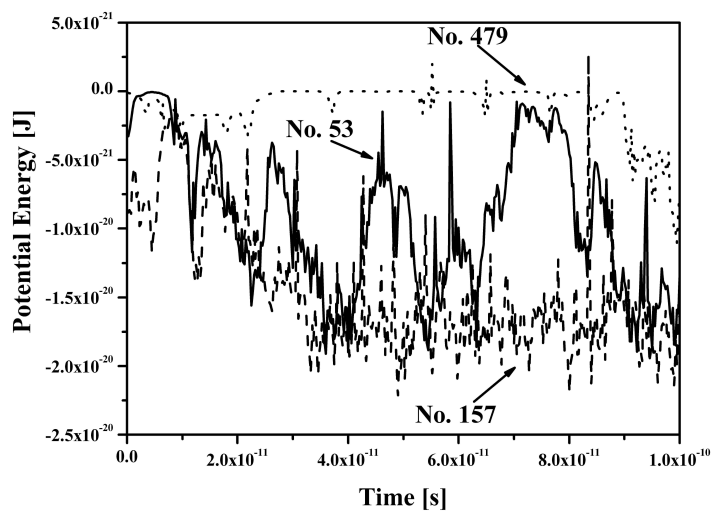
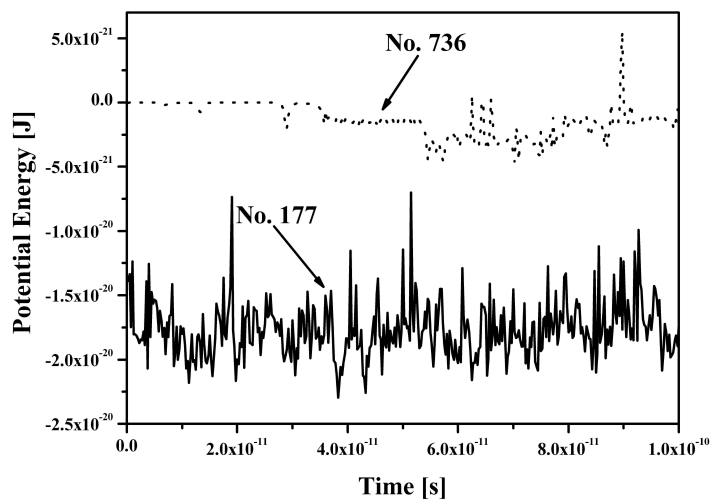


Fig. 3-10 Potential energy and the number of neighboring molecules in the case of moving into the liquid state from the liquid-vapor interface

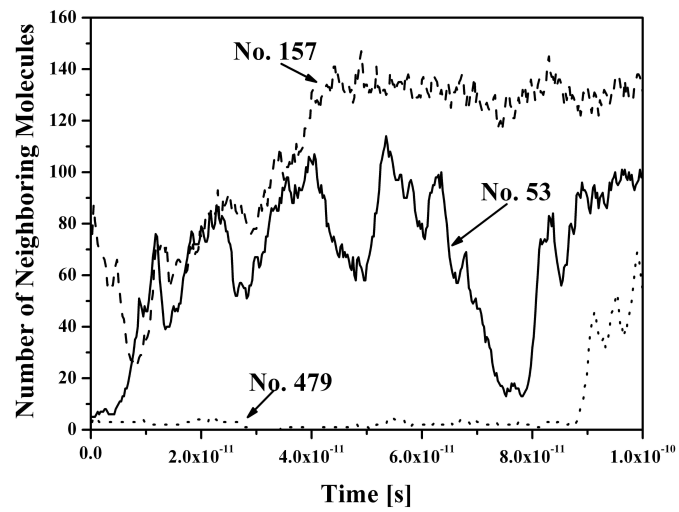


(a)

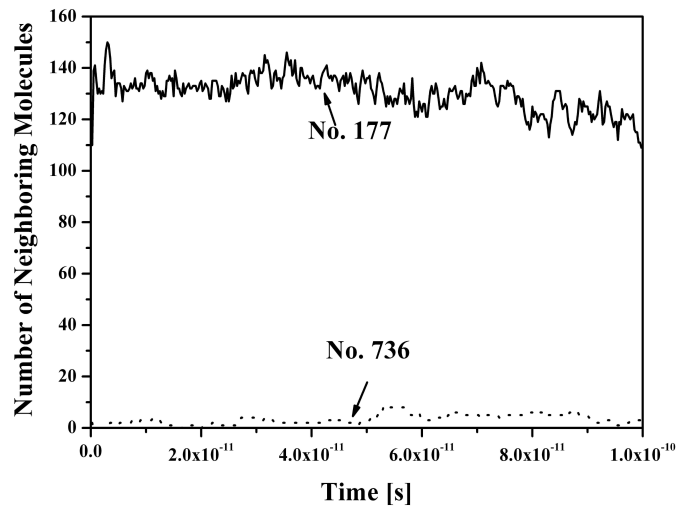


(b)

Fig. 3-11 Potential energy of molecules



(a)



(b)

Fig. 3-12 The number of neighboring molecules

4. 결론

본 연구에서는 에틸렌글리콜에 CuNi와 CuAg 나노구리합금분말을 첨가한 나노유체의 열전도 특성을 기존유체의 열전도 특성과 비교 실험하였고, 전산모의실험에 있어 기체, 액체, 기액계면에서의 포텐셜 에너지와 주위 분자수에 대해서 정량적으로 검토하였다.

우선 나노유체의 열전도 특성에 대하여 실험한 경우, 에틸렌글리콜에 CuAg 나노분말 0.1vol%를 혼합한 경우 117% 열전도율 상승을 나타내었고, CuNi를 0.5vol% 혼합한 경우 124%의 상승을 보여주었다.

분자동역학을 이용하여 전산모의실험을 한 결과, 증기상태보다 액체상태의 밀도가 더 높기 때문에 액체영역에 위치하는 분자의 경우 주위 분자 수는 증기영역에 존재하는 분자의 그것보다 많을 것이라고 예상되는 물리적인 직관과 일치하는 결과를 얻었다. 주위 분자수가 많을수록 분자간 상호작용에 의해 포텐셜 에너지는 낮아지며, 분자가 액체영역에 위치하는 경우 분자 한 개당 평균적으로 -10^{-20} J의 값을 가지며, 증기영역에 존재하는 경우에는 -10^{-21} J 정도임을 알 수 있었다. 기액계면영역의 분자는 상기의 두 값들 사이의 포텐셜 에너지를 가지지만 전체적으로는 액체영역에 있는 분자의 포텐셜 에너지에 더 가까운 값을 보여주었다.

참고문헌

- [1] Q.Z. Xue, Model for effective thermal conductivity of nanofluids, *Phys. Lett. A*, 307, pp313-317, 2003.
- [2] W. Yu, S.U.S. Choi, The role of interfacial layers in the enhanced thermal conductivity of nanofluids: A renovated Maxwell model, *J. Nanoparticle Research* 5, pp167-171, 2003.
- [3] S.U.S. Choi, Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles, in: D.A. Siginer, H.P. Wang,(Eds.), *Developments and Applications of Non-Newtonian Flows*, ASME, New York, FED-Vol. 231/MD-Vol. 66, pp.99-105, 1995.
- [4] Maxwell, J. C., *A Treatise on Electricity and Magnetism*, Clarendon Press, 2nd ed., 1, 435, 1881.
- [5] Y. Xuan, Q. Li, Investigation on convection heat transfer and flow features of nanofluids, *J. Heat Transfer*, vol125, pp.151-155, 2003.
- [6] Y. Xuan, Q. Li, Heat transfer enhancement of nanofluids, *Int. J. Heat and Fluid Flow* 21, pp.58-64, 2000.
- [7] Y. Xuan, W. Roetzel, Conceptions for heat transfer correlation of nanofluids, *Int. J. Heat and Mass Transfer* 43, pp3701-3707, 2000.
- [8] J.A. Eastman, S.U.S. Choi, S. Li, W. Yu, L.J. Thompson, Anomalously increased effective thermal conductivities of ethylene glycol-based

- nanofluids containing copper nano-particles, Appl. Phys. Lett. vol. 78 (6), pp. 718-720, 2001.
- [9] S. Lee, S.U.S. Choi, S. Li, J.A. Eastman, Measuring Thermal Conductivity of Fluids Containing Oxide Nanoparticles, ASME J. Heat Transfer 121, pp.280, 1999.
- [10] H.Q. Xie, J.C. Wang, T.G. Xi, Y. Liu, F. Ai, Thermal conductivity enhancement of suspensions containing nanosized alumina particles, J. Appl. Phys. 91, pp.4568-4572, 2002.
- [11] S.U.S. Choi, Z.G. Zhang, W. Yu, F.E. Lockwood, E.A. Grulke, Anomalous thermal conductivity enhancement in nanotube suspensions, Appl. Phys. Lett. 79, pp.2252-2254, 2001.
- [12] P. Keblinski, S.R. Phillpot, S.U.S. Choi, J.A. Eastman, Mechanisms of heat flow in suspensions of nano-sized particles (nanofluids), Int. J. Heat and Mass Transfer 45, pp.855-863, 2002.
- [13] 임세영, 나노역학 및 나노소재에 관한 테마기획을 내면서, 기계저널, 제42권, 제11호, pp.26-28, 2002.
- [14] Frank P. Incropera, David P. DeWitt(정태용, 박복춘, 박형구, 부준홍, 서정세 공역), Heat and Mass Transfer(열전달), Wiley, 5th ed. pp.59-64, 2003.
- [15] 강희재, 황정남 옮김, 전산시뮬에 의한 물질과학(분자동역학과 몬테칼로 전산시뮬), 시그마프레스, pp.11-12, 2001.
- [16] D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation: From

- Algorithms to Applications, Academic Press, New York, pp.1-6, 1996.
- [17] 김상락, 분자동역학, 아카넷, pp.5-6, pp.81-83, 2003.
- [18] J.M. HAILE, Molecular Dynamics Simulation (Elementary Methods), John Wiley & Sons, pp.38-39, pp.81-86, pp.177-193, 1997.
- [19] S.H. Choi, S. Maruyama, K.K. Kim and J.H. Lee, Evaluation of the Phonon Mean Free Path in Thin Films by Using classical Molecular Dynamics, J. of Kor. Phys. Soc., Vol 43, No. 5, pp. 747-753, 2003.
- [20] 최현규, 송치성, 김혜민, 이정혜, 최순호, 분자동역학법을 이용한 기액계면 현상에 관한 연구, 대한기계학회, 제29권 제1호, pp.159-168, 2005.
- [21] S. Maruyama, S. Matsumoto and A. Ogita, Surface Phenomena of Molecular Clusters by Molecular Dynamics Method, Thermal Science & Engineering Vol. 2, No. 1, pp.77-84, 1994.